

# Computational methods for ice flow simulation

**Doctoral Thesis****Author(s):**

Kallen-Brown, Jedediah Aspen

**Publication date:**

2011

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-007316245>

**Rights / license:**

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 19948

# **Computational methods for ice flow simulation**

A dissertation submitted to  
ETH ZÜRICH

for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by  
JEDEDIAH ASPEN KALLEN-BROWN

Master of Science (Mathematics) University of Alaska Fairbanks  
Bachelor of Science (Physics) University of Alaska Fairbanks  
Bachelor of Science (Mathematics) University of Alaska Fairbanks

born  
4 June, 1983

citizen of  
United States of America

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. M. Funk, examiner

Prof. Dr. W. Kinzelbach, examiner

Dr. M. Lüthi, examiner

Prof. Dr. E. L. Bueler, co-examiner

Dr. B. F. Smith, co-examiner

2011

# Abstract

A large amount of scientific effort worldwide is focused on understanding and predicting the advance and consequences of climate change, due to its potentially disastrous affects on human society. Numerical models are playing an ever-increasing role in the analysis of complex processes, but current modeling approaches are limiting the scope of problems that can be addressed. With the ever-increasing complexity, it is difficult to verify correctness of the implementation, assess accuracy of the simulation, or distinguish between numerical and modeling errors. The established strategies for model coupling, while generally thought to be necessary in order to manage complexity, cause significant stability and accuracy problems. Efficiency of nonlinear solvers represent a further obstacle to high resolution and advanced analysis techniques such as optimization, uncertainty quantification, and stability analysis. Present implementations also tend to use low-order discretizations which poorly utilize emerging hardware, are low accuracy, and cause numerical artifacts in some cases. This thesis contains contributions to each of these challenges.

A new perspective on high-order methods for finite element analysis is introduced. This formulation is well-suited to advances in linear and nonlinear solvers and offers dramatically better utilization of modern hardware than conventional methods. Dohp, a new general purpose library based on this method is presented, and the performance is shown to be several times faster than other widely used finite element libraries. Through new software interfaces, this performance is achieved while retaining more run-time flexibility in terms of element and preconditioning choice, and drastically better performance as the order of the element increases. The library also retains more geometric information than existing open source libraries, permitting more natural coupling to CAD and geometric models, as well as the implicit solution of equations in which the domain is part of the solution.

A new Newton-Krylov-Multigrid solver for the hydrostatic equations of ice sheet flow is presented. The high cost of solving the hydrostatic equations using conventional methods has been the principle impediment to their use in large-scale ice sheet models, causing existing models to fall back to simpler momentum balance models. In addition to poor algorithms, the community has also suffered from lack of quality parallel implementations, thus further limiting the scope of problems that could be solved. The new solver demonstrates textbook multigrid efficiency on a variety of demanding problems, offering several orders of magnitude speedup for problem sizes of interest, and nearly perfect strong and weak scalability on parallel hardware.

A new algebraic interface for multiphysics coupling is introduced. Robust coupling of multiple interacting physical processes is a challenging problem in which many commonly used methods are fundamentally inadequate. The best methods are highly problem dependent, change as the number of coupled processes grows, and are a highly active area of research. A crucial limitation of earlier software was that trying different methods generally involved a great deal of error-prone software development by the user. This poor software support made it difficult to test the quality and performance of different methods, thus locking projects in to methods that may actually be ill-suited to the problems that are eventually encountered. The new algebraic interface allows an arbitrary number of physical processes to be coupled using a wide range of methods which can be selected and combined at run-time. It permits straightforward reuse of single physics modules with no code modification, thus offering better support for model verification and extensibility. The interface offers higher performance and a great deal more flexibility in choice of methods than previous software. This software, along with implicit time integrators for differential algebraic equations and optimal explicit strong stability preserving integrators for hyperbolic

systems, has been added to PETSc and is in production use by several external groups.

Improvements in throughput on modern hardware are presented. Current methods for solving partial differential equations exhibit very low utilization of modern hardware, often less than 5 percent, due to their overwhelming dependence on memory bandwidth. Part of this under-utilization was due to implementation issues with sparse matrix kernels preventing good reuse of high-level caches. This was rectified within this work by improving PETSc's sparse matrix kernels by 20 to 30 percent, and performance is now close to the theoretical limit of the hardware. The more fundamental limitation of memory bandwidth cannot be overcome by implementation optimization; it requires changing the underlying algorithm. In the context of the finite element library Dohp, this can be achieved by eschewing assembled sparse matrices in favor of a matrix-free representation that has higher arithmetic intensity and uses much less memory for everything beyond lowest order elements. This transformation permits an order of magnitude improvement in hardware utilization and is transparently available to the user in the Dohp library. Improved support for such unassembled representations was integrated into the multi-physics coupling interface.

Robustness and accuracy requirements for ice flow problems place many constraints on the discretization and treatment of boundary conditions. Many of these technical requirements are undocumented in the glaciology literature and hampering current efforts for robust simulation. These technical issues are investigated and conclusions are drawn, with practical consequences to the present work and future development of methods for ice flow.

Current formulations for polythermal ice do not account for density variation caused by melt fraction and thus commit a conservation error of first order in the melt fraction. A new continuum formulation that exactly conserves mass, momentum, and energy independent of the melt fraction is presented. A high order finite element discretization for this system is proposed and numerical accuracy is addressed using manufactured solutions. This formulation treats all terms, including energy transport, implicitly in time, which allows the direct application of Newton-Krylov methods to compute the steady state. Steady state solutions are useful for parameter inversion, "spin up", and stability analysis. They are conventionally computed using direct time integration with a time step size constrained by the CFL stability criterion. With this constraint, they require a mesh-dependent number of time steps, typically very large, to reach steady state. The Newton-Krylov method converges in a small, mesh-independent number of iterations. This steady-state solver is applied to a section of the ice stream channel at Jakobshavn Isbræ. Setting up a model of an outlet glacier using realistic geometry and boundary conditions is a time-consuming task. This is especially true if a geometric model is needed to define slip conditions, or if the mesh needs to conform to the grounding line. Visualization is also complicated by the need to georeference model results. These difficulties have been partially mitigated by having the analysis code work with georeferenced input in any format and any projection, and produce georeferenced output.

The purpose of this thesis is not to make a specific prediction, but rather to improve the methods and process available for future predictive modeling, especially by glaciologists less interested in numerical and computational issues.

## Zusammenfassung

Viele der weltweiten wissenschaftlichen Anstrengungen sind darauf ausgerichtet, das Verständnis des Klimawandels und seiner Konsequenzen zu verstehen und vorherzusagen, dies insbesondere auch im Hinblick auf die möglicherweise katastrophalen Auswirkungen auf die Gesellschaft. Numerische Modelle spielen eine immer wichtigere Rolle bei der Analyse komplexer Prozesse, allerdings ist der Anwendungsbereich der Modelle limitiert durch die gegenwärtigen Modell-Ansätze. Mit zunehmender Modell-Komplexität ist es schwierig, die Güte der Implementation zu verifizieren, die Genauigkeit der Simulation zu bestimmen, und zwischen numerischen und Modellfehlern zu unterscheiden. Die etablierten Strategien der Modellkopplung, die als notwendig zur Bewältigung der Komplexität angesehen werden, verursachen signifikante Stabilitäts- und Genauigkeitsprobleme. Die Effizienz von nichtlinearen Solvern sind ein weiteres Hindernis für hohe Auflösung und fortgeschrittene Analysetechniken wie etwa Optimierung, Quantifizierung der Ungenauigkeit und Stabilitätsanalyse. Heutige Implementierungen verwenden Diskretisierungen niedriger Ordnung welche moderne Hardware nur schlecht ausnutzt, sind von niedriger Genauigkeit, und rufen in gewissen Fällen numerische Artefakte hervor. Diese Arbeit enthält Beiträge zu jeder dieser Herausforderungen.

Eine neue Perspektive auf Finite-Elemente Methoden höherer Ordnung wird eingeführt. Diese Formulierung ergänzt die Fortschritte bei linearen und nichtlinearen Solvern, und nützt die Eigenschaften moderner Hardware viel besser aus als herkömmliche Methoden. Eine neuentwickelte, allgemein verwendbare Programm-Bibliothek mit Namen Dohp wird präsentiert, deren Performance um ein vielfaches besser ist als diejenige von anderen gebräuchlichen Finite-Elemente Programm-Bibliotheken. Die hohe Performance wird erreicht durch neue Software-Interfaces, während gleichzeitig die Flexibilität zur Laufzeit bei der Auswahl von Elementen und Preconditionern grösser ist. Die Performance des Codes steigt drastisch mit höherer Element-Ordnung. Diese Programm-Bibliothek stellt auch mehr geometrische Information bereit als andere Open-Source Codes, und erlaubt dadurch eine natürliche Kopplung mit CAD und geometrischen Modellen, sowie die implizite Lösung von Gleichungssystemen, in denen die Modell-Geometrie Teil der Lösung ist.

Ein neuer Newton-Krylov Multigrid-Solver für die hydrostatischen Eisschild-Gleichungen wird dargestellt. Der hohe Aufwand zur Lösung der hydrostatischen Gleichungen mit konventionellen Methoden war bisher der Hauptgrund für deren Nicht-Gebrauch in grossen Eisschildmodellen – stattdessen werden einfachere Approximationen der Impuls-Bilanz verwendet. Neben den schlechten Algorithmen hat die Modellier-Gemeinde auch keine gute Implementation für Parallelcomputer zur Hand, was den Anwendungsbereich weiter stark einschränkt. Der neue Solver zeigt eine Multigrid-Effizienz wie aus dem Lehrbuch für mehrere anspruchsvolle Probleme, bietet eine Laufzeitverminderung um Grössenordnungen für interessierende Problemgrössen, und zeigt nahezu perfekte starke und schwache Skalierbarkeit auf paralleler Hardware.

Ein neues algebraisches Interface für die Kopplung verschiedener Modell-Codes wird eingeführt. Die robuste Kopplung mehrerer physikalischer Prozesse ist eine Herausforderung für welche viele der normalerweise verwendeten Methoden inadäquat sind. Welche Koppelungsmethode sich am besten eignet ist problemabhängig, ändert sich mit der Anzahl der betrachteten Probleme, und sind ein Gebiet aktiver Forschung. Eine entscheidende Einschränkung bisheriger Software war, dass das Ausprobieren verschiedener Methoden üblicherweise einen grossen Programmieraufwand des Benutzers erforderte. Die mangelnde Unterstützung durch die Software erschwerte das Testen von Qualität und Performance verschiedener Methoden, und führte oft zur Verwendung inadäquater Methoden für die zu lösenden Probleme.

Das neue algebraische Interface erlaubt es, eine beliebige Zahl physikalischer Prozesse mit einer grossen Auswahl an Methoden zu koppeln, welche zur Laufzeit ausgewählt und kombiniert werden können. Es erlaubt die unveränderte Verwendung bestehender Programmmodule für die einzelnen Prozesse, und bietet daher bessere Unterstützung von Verifikation und Extensibilität. Das Interface bietet eine höhere Performance und weitaus mehr Flexibilität bei der Auswahl der Methoden als bisherige Software. Diese Software, zusammen mit impliziten Zeitintegratoren für differentiell-algebraische Gleichungen sowie optimaler expliziter, stark stabilitätserhaltender Integration für hyperbolische Systeme, wurde in PETSc implementiert und ist bei mehreren externen Forschungsgruppen in Gebrauch.

Verbesserungen des Durchsatzes auf moderner Hardware werden dargestellt. Bisherige Methoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen zeigen eine schlechte Ausnützung moderner Hardware, oft unter 5 Prozent, wegen der überwiegenden Abhängigkeit von der Memory-Bandbreite. Zum Teil war diese schlechte Ausnützung auf Implementationsprobleme der “Sparse Matrix Kernels” zurückzuführen, die zu schlechter Auslastung des high-level Caches führten. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die PETSc Sparse Matrix Kernels um 20 bis 30 Prozent verbessert – die Performance ist nun nahe der theoretischen Grenze der Hardware. Der fundamentalen Limitierung von Memory-Bandbreite lässt sich nicht mit einer optimierten Implementierung beikommen, dafür sind Veränderungen des Lösungs-Algorithmus notwendig. Im Kontext der Finite-Elemente-Bibliothek Dohp kann das durch Vermeiden von assemblierten “Sparse-Matrices” erreicht werden, indem der Matrix-freien Repräsentation Vorzug gegeben wird, welche eine höhere arithmetische Intensität und stark reduzierte Speicheranforderungen für alle Elemente, ausser jener der niedrigsten Ordnung, hat. Diese Transformation erlaubt eine Verbesserung um eine Grössenordnung im Hardware-Gebrauch, und ist in Dohp für den Benutzer transparent anwendbar. Eine verbesserte Unterstützung für nicht-assemblierte Repräsentationen wurde auch im Multi-Physik-Interface integriert.

Die Robustheits- und Genauigkeitsanforderungen für Eisfliessen schränken die Auswahl der Diskretisierung und die Behandlung der Randbedingungen ein. Viele dieser technischen Anforderungen sind in der Glaziologie-Literatur nicht dokumentiert, und behindern gegenwärtige Anstrengungen einer robusten Simulation. Diese technischen Anforderungen werden untersucht und Folgerungen gezogen, die praktische Konsequenzen für diese Arbeit, sowie auch für künftige Entwicklungen der Methoden für die Modellierung des Eisfliessens haben.

Gegenwärtige Formulierungen für polythermales Eis vernachlässigen die Dichtevariation durch die Schmelze, und verursachen einen Erhaltungs-Fehler erster Ordnung im Schmelzanteil. Eine neue Kontinuums-Formulierung mit exakter Erhaltung von Masse, Impuls und Energie, unabhängig vom Schmelzanteil, wird präsentiert. Für dieses System wird eine Diskretisierung hoher Ordnung vorgeschlagen, und die numerische Genauigkeit wird mit “Manufactured Solutions” untersucht. Diese Formulierung behandelt alle Terme, einschliesslich des Energietransportes, implizit in der Zeit, was die Verwendung von Newton-Krylov Methoden zur Berechnung von stationären Zuständen erlaubt. Solche stationäre Zustände sind nützlich zur Inversion von Parametern, “spin up”, sowie zur Stabilitätsanalyse. Sie werden üblicherweise mit direkter Zeitintegration berechnet mit einer Schrittweite die durch die CFL Stabilitätsbedingung begrenzt ist. Diese Bedingung verlangt üblicherweise eine sehr grosse, netzabhängige Anzahl von Zeitschritten zur Erreichung eines stationären Zustandes. Die Newton-Krylov Methode hingegen konvergiert nach einer kleinen, netzunabhängigen Anzahl Iterationen. Dieser Solver wird für einen Ausschnitt des Jakobshavn Isbræ angewendet. Ein solches Modell eines Outlet-Gletschers mit realistischer Geometrie und Randbedingungen zu erstellen ist zeitaufwendig, insbesondere wenn ein geometrisches Modell für die Darstellung der Gleit-Randbedingung benötigt wird, oder wenn das Netz zur Grounding Line konform sein soll. Die Visualisierung der Resultate wird erschwert durch die Notwendigkeit einer Georeferenzierung. Diese Schwierigkeiten wurden teilweise dadurch gelöst, dass der Code mit georeferenzierten Eingabedaten in beliebigem Format und Projektion auskommt, und eine georeferenzierte Ausgabe erzeugt.

Das Ziel dieser Arbeit ist nicht, genaue Vorhersagen zu machen, sondern die Methoden und Prozesse für zukünftige Vorhersage-Modelle zu verbessern – dies insbesondere für Glaziologen die weniger an numerischen und implementations-bedingten Problemen interessiert sind.